

КАСКАДНЫЙ ВЗРЫВ АТОМА ПОСЛЕ ИОНИЗАЦИИ ВНУТРЕННЕЙ ОБОЛОЧКИ

А. Г. КОЧУР

Ростовский государственный университет путей сообщения, Ростов-на-Дону

CASCADE EXPLOSION OF AN ATOM AFTER THE IONIZATION OF ITS INNER SHELL

A. G. KOCHUR

The ionization of an atomic inner shell can give rise to the process of a cascading multi-step decay of the excited state produced – the cascade explosion of the atom. Such processes can substantially increase the destructive consequences of the effect of ionizing radiation on matter and biological objects. Due to the destructive effects of cascade explosions on fragile biochemical structures which support life, the existence of life forms based on elements heavier than those of the second row is impossible in the presence of an ionizing-radiation background.

Ионизация внутренней оболочки атома может породить каскадный процесс многошагового распада образовавшегося возбужденного состояния, приводящий к многократной ионизации атома – каскадный взрыв атома. Такие процессы могут существенно усилить вредные последствия воздействия ионизирующих излучений на вещество и биологические объекты. По причине разрушительного воздействия каскадных взрывов на тонкие биохимические структуры, обеспечивающие жизнедеятельность, в условиях радиационного фона невозможно существование жизни на основе элементов тяжелее, чем элементы второго ряда.

www.issep.rssi.ru

СОЗДАНИЕ И РАСПАД ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ АТОМОВ

Создание вакансии во внутренней оболочке атома (ионизация внутренней оболочки) переводит атом из основного состояния с минимальной энергией в возбужденное состояние. Если принять за нуль отсчета энергии основного состояния атома, то энергия атома в возбужденном ионизированном состоянии равна энергии ионизации, то есть энергии, которую надо затратить, чтобы перевести атом из основного состояния в возбужденное. Наиболее высоковозбужденные состояния многоэлектронных атомов содержат вакансии в глубоких электронных оболочках, так как электроны этих оболочек сильно связаны с ядром атома и для их вырывания требуется затратить много энергии. Сильно возбужденные состояния с вакансиями в глубоких оболочках образуются при облучении атомов рентгеновскими или γ -фотонами или их бомбардировке высокоэнергетическими частицами.

Атом в возбужденном состоянии не может находиться долго и переходит в одно из состояний, лежащих ниже по энергии. Такой переход называют распадом возбужденного состояния атома или распадом вакансии. На рис. 1 схематично показана диаграмма энергетических уровней, иллюстрирующая процессы создания возбужденного состояния с глубокой вакансией и его последующий распад. Очевидно, что, поскольку для многоэлектронных атомов может существовать большое количество возбужденных состояний, лежащих ниже по энергии, чем начальное возбужденное состояние, процесс распада исходной внутренней вакансии может представлять собой сложный многошаговый процесс: исходное состояние распадается в одно из промежуточных возбужденных состояний, оно, в свою очередь, распадается в одно из нижележащих состояний и т.д. На диаграмме рис. 1 показан один из вероятных путей распада.

В многоэлектронном атоме существуют два способа распада глубоких вакансий: радиационный и

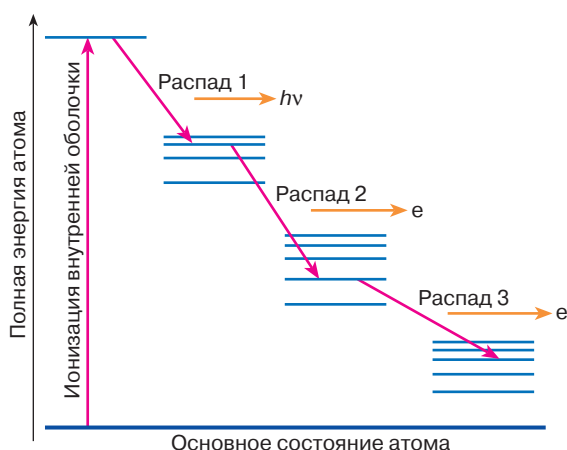


Рис. 1. Схематическая энергетическая диаграмма состояний атома, иллюстрирующая процессы ионизации глубокой оболочки атома и последующий распад образовавшегося высоковозбужденного состояния. Каждый шаг распада сопровождается испусканием фотона ($h\nu$) или электрона (e). На схеме указан один из большого числа возможных путей распада

безрадиационный. Они схематично изображены на рис. 2 на примере распада $1s$ -вакансии атома аргона (конфигурация основного состояния $1s^2 2s^2 2p^6 3p^6$). При одном из возможных радиационных распадов электрон из $2p$ -оболочки переходит в $1s$ -оболочку, захлопывая

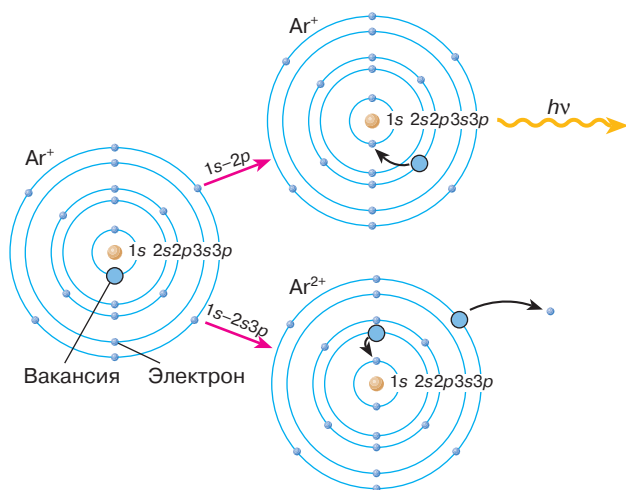


Рис. 2. Схема, иллюстрирующая радиационный и безрадиационный способы распада $1s$ -вакансии в атоме аргона. При радиационном переходе внутренняя вакансия захлопывается одним из внешних электронов и происходит излучение фотона. При безрадиационном переходе один из внешних электронов захлопывает внутреннюю вакансию, а другой вылетает из атома. На схеме показаны радиационный $1s-2p$ - и безрадиационный $1s-2s3p$ -переходы

исходную вакансию. В результате вакансия перемещается в более внешнюю оболочку, а избыток энергии уносится фотоном, излучаемым в процессе перехода.

При безрадиационном распаде один из внешних электронов захлопывает вакансию, а другой выбрасывается из атома, унося избыточную энергию. Таким образом, безрадиационный распад вместо одной исходной вакансии (например, $1s$) создает две вакансии (например, $2s$ и $3p$) в более внешних электронных оболочках.

Радиационные и безрадиационные переходы принято обозначать указанием именно вакансий начального и конечного состояний. Так, на рис. 2 изображены схемы радиационного $1s-2p$ -перехода и безрадиационного $1s-2s3p$ -оже-перехода.

Отметим, что оба конечных состояния $Ar^+(2p^{-1})$ и $Ar^{2+}(2s^{-1}3p^{-1})$, возникшие в результате двух (из большого числа возможных) указанных на рис. 2 распадов $1s$ -вакансии, подвержены дальнейшему распаду. Распадать могут возникшие $2s$ - и $2p$ -вакансии, например возможны радиационные переходы $2p-3s$, $2s-3p$ и большое количество безрадиационных переходов, например $2s-3s3p$, $2p-3s3s$, и т.д. Что же касается вакансий в $3p$ -оболочке, то ее дальнейший распад невозможен из-за отсутствия электронов на более внешних оболочках. На этом примере мы видим, что последовательные распады вакансий будут продолжаться до тех пор, пока все вакансии не сосредоточатся в самых внешних электронных оболочках атома.

ЧТО ТАКОЕ КАСКАДНЫЙ ВЗРЫВ АТОМА

Расчеты показывают, что наиболее вероятными распадами из множества возможных для данной исходной вакансии являются распады с образованием вакансий в оболочках, ближайших к оболочке с исходной вакансией. Кроме того, наиболее вероятными в большинстве случаев являются безрадиационные распады, поэтому число вакансий в электронных оболочках атома, как правило, увеличивается после каждого шага распада. Каждая из новых вакансий, образовавшихся в результате очередного шага распада, в свою очередь, может распасться далее, если существуют электроны на более внешних оболочках. Это приводит к быстрому — каскадному увеличению количества возможных путей распада состояний, возникающих на первых шагах распада. По мере развития каскада вакансии перемещаются во все более внешние оболочки и их число увеличивается при каждом безрадиационном распаде. Этот процесс, называемый каскадным взрывом, заканчивается, когда после очередного шага распада все вакансии сосредоточиваются в наиболее внешних оболочках и не могут распасться далее. Ясно, что из-за большого

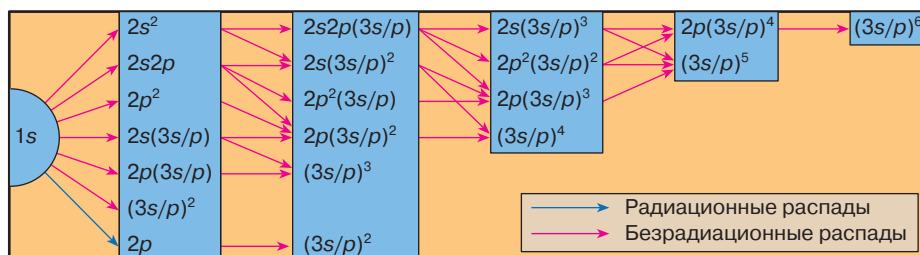


Рис. 3. Упрощенная схема дерева распада 1s-вакансии в атоме аргона. Электронные конфигурации обозначены указанием имеющихся вакансий, например $2p^2(3s/p)^2$ обозначает следующие конфигурации: $1s^2 2s^2 2p^4 3s^0 3p^6$, $1s^2 2s^2 2p^4 3s^1 3p^5$ или $1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^4$

разнообразия возможных способов распада на начальных и промежуточных стадиях развития каскада этот процесс может быть очень сложным.

На рис. 3 представлена очень упрощенная схема каскадного распада 1s-вакансии в атоме аргона (конфигурация основного состояния $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$). Схемы, подобные изображенной на рис. 3, называют деревьями распада, а переходы, изображенные на рис. 2 стрелками, — ветвями деревьев распада. Точки ветвления представляют собой исходную или промежуточные возбужденные конфигурации атома. На рис. 3 электронные конфигурации обозначены указанием имеющихся вакансий. Например, $2s(3s/p)^3$ обозначает конфигурацию с одной вакансией в 2s-оболочке и тремя вакансиями в подоболочках с главным квантовым числом 3, например $2s^1 3s^1 3p^4$ или $2s^1 3s^2 3p^3$.

Из качественного анализа схемы дерева распада, приведенной на рис. 3, следует, что в результате ионизации 1s-оболочки атома аргона возможно образование ионов с зарядами вплоть до 6+. Для осмысленного анализа ситуации необходимо уметь измерять и вычислять вероятности образования многократных ионов. Если эти вероятности велики, то придется по-новому взглянуть на проблему взаимодействия ионизирующих излучений с веществом. Если, например, атом железа, входящий в состав молекулы гемоглобина, после ионизации 1s-оболочки в результате каскадного взрыва с большой вероятностью превратится в ион Fe^{3+} , то что станет с этой молекулой?

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ ИЗМЕРЕНИЯ ВЕРОЯТНОСТЕЙ ОБРАЗОВАНИЯ КАСКАДНЫХ ИОНОВ

Общая схема эксперимента по измерению вероятностей образования многозарядных ионов представлена на рис. 4. Рентгеновское излучение пересекает зону взаимодействия, в которой находятся свободные атомы, и ионизирует эти атомы. Ионизированные атомы в течение короткого времени (порядка 10^{-15} с) превращаются в многозарядные ионы в результате каскадных взрывов. Зона взаимодействия находится во внешнем электрическом поле, которое отсасывает образовавшиеся ионы из зоны взаимодействия и ускоряет их в направ-

лении масс-спектрометра, позволяющего определять относительные количества ионов каждой зарядности.

Первые эксперименты подобного рода были проведены в пионерских работах Т.А. Карлсона и М.О. Краузе с сотрудниками в Национальной лаборатории Оук-Риджа (США) [1, 2]. Авторы этих работ, используя в качестве источников рентгеновского излучения рентгеновские трубки и магнитный масс-спектрометр, получили спектры выхода ионов благородных газов. В дальнейшем точность измерений удалось существенно повысить, используя монохроматизированное синхротронное рентгеновское излучение и масс-спектрометры, основанные на измерении времени свободного дрейфа ионов (см., например, [3]).

МЕТОДЫ ТЕОРЕТИЧЕСКОГО ОПИСАНИЯ КАСКАДОВ

Очевидно, что дерево каскадного распада можно будет полностью описать, если для каждой точки ветвления будут определены вероятности перехода в каждую из возможных конечных конфигураций данного шага распада. Эти вероятности называются вероятностями ветвления (branching ratios). Расчет вероятностей ветвления представляет собой достаточно сложную квантово-механическую задачу, однако здесь нет принципиальных

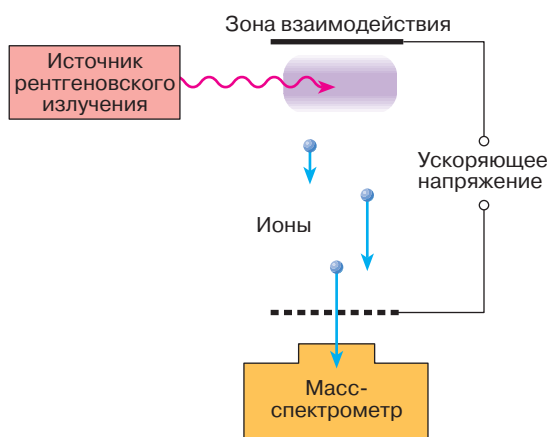


Рис. 4. Схема эксперимента по измерению вероятностей образования многозарядных ионов

трудностей. Пусть нам известны вероятности ветвления для каждой из распадающихся промежуточных конфигураций. Существуют два подхода к описанию каскадов распадов.

Первый подход заключается в применении метода статистических испытаний (метод Монте-Карло) [4]. Суть этого метода заключается в следующем. Многократно проводится такой численный эксперимент. На первом шаге распада случайным образом (с учетом известных отношений ветвления) выбирается одна из числа возможных конфигураций, в которую распадается исходное возбужденное состояние. Затем для этой конфигурации случайным образом выбирается одна из возможных конфигураций следующего шага распада и т.д., пока на каком-то шаге не возникнет конфигурация, которая далее не распадается. Эта конечная конфигурация соответствует иону определенного заряда $+q$. Такой численный эксперимент повторяется большое количество раз, и при этом подсчитывается, сколько раз образовались ионы каждой из зарядностей. В соответствии с определением вероятности события вероятность $P(+q)$ образования ионов определенного заряда $+q$ равна отношению числа опытов, закончившихся образованием таких ионов, к общему числу проведенных опытов. Первые теоретические расчеты по этой схеме были проведены в 60-х годах в упомянутых выше работах Карлсона и Краузе одновременно с экспериментальным измерением вероятностей выхода ионов [1, 2]. Результаты расчетов достаточно хорошо совпали с экспериментом

Альтернативный подход к описанию каскадов заключается в непосредственном конструировании деревьев каскада, когда после каждого шага распада запоминаются все конфигурации, которые могут возникнуть после распада всех вакансий во всех конфигурациях из предыдущего шага распада. Вероятность образования конкретной конечной конфигурации C складывается из вероятностей, соответствующих различным путям распада, приводящим из исходной конфигурации с глубокой вакансией в C . В свою очередь, вероятность для каждого пути распада равна произведению вероятностей ветвления для последовательных ветвей дерева распада, ведущих от исходной конфигурации к C . Следует отметить, что проведение расчетов подобного рода требует вычисления характеристик огромного количества (до нескольких миллионов) промежуточных атомных конфигураций, хранения и анализа этой информации. По этой причине подобные расчеты для сложных каскадов стали возможны лишь в последнее время [5, 6].

КАСКАДНЫЕ ВЗРЫВЫ И ВОЗМОЖНЫЕ ПОСЛЕДСТВИЯ ВОЗДЕЙСТВИЯ ИОНИЗИРУЮЩИХ ИЗЛУЧЕНИЙ НА ВЕЩЕСТВО И БИОЛОГИЧЕСКИЕ ОБЪЕКТЫ

На рис. 5 приведены рассчитанные вероятности образования многократно заряженных ионов ксенона (конфигурация основного состояния $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6$) в результате распада одиночных вакансий в оболочках атома. На соответствующих диаграммах приведены также средние значения заряда $\langle q \rangle$ образующихся ионов. Из приведенных данных видно, что вероятности образования ионов большого заряда в результате каскадного взрыва атома действительно велики. При этом, чем глубже исходная вакансия, тем дальше в область больших зарядов смещается зарядовый спектр выхода ионов. Итак, при анализе последствий облучения вещества ионизирующими излучениями (рентгеновские, γ -лучи, потоки

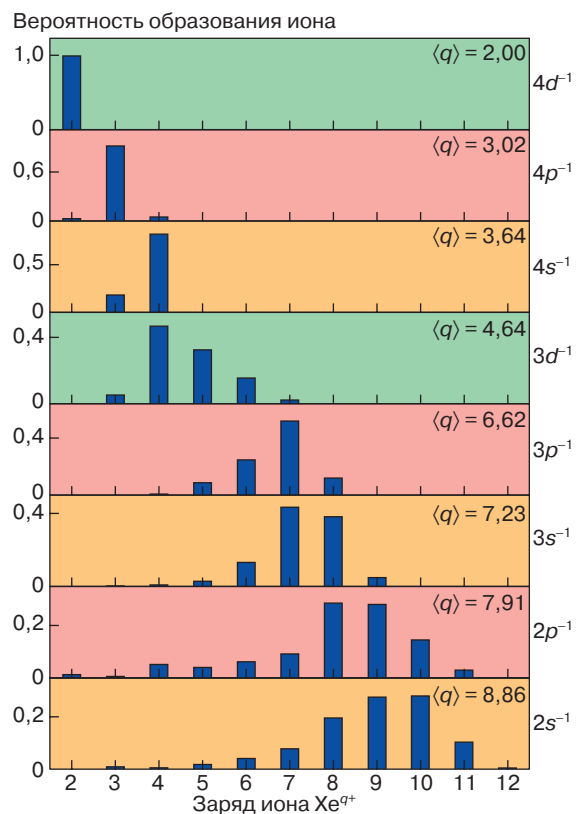


Рис. 5. Вероятности образования ионов Xe^{q+} в результате каскадных распадов одиночных начальных вакансий в электронных оболочках. Конфигурации исходных ионизированных состояний указаны справа от диаграмм. На диаграммах приведены средние значения $\langle q \rangle$ зарядов образующихся ионов

высокоэнергетических элементарных частиц) эффекты каскадных взрывов ионизированных атомов должны тщательно анализироваться.

Фотон, ионизирующий атом вещества, можно сравнить с пулей, попадающей в бомбу, которая затем взрывается и производит значительные разрушения. Вспервых, как мы видели, ионизированный атом после каскадного взрыва, как правило, превращается в сильно заряженный ион, который своим мощным электрическим полем может искажать и разрушать химические связи. Кроме того, необходимо вспомнить, что каждый акт распада сопровождается или излучением фотона, или выбросом электрона, то есть в самом процессе каскадного распада взрывающийся атом испускает фотоны и электроны. Фотоны и электроны, испускаемые на первых шагах каскадного распада, когда в переходах участвуют электроны в основном глубоких оболочек, могут иметь большую энергию. Они, в свою очередь, могут ионизировать соседние атомы и породить новые каскадные взрывы. Так что бомба (атом), в которую попала пуля (фотон), оказывается лежащей на складе боеприпасов. Очаг поражения вокруг первоначально ионизированного атома может оказаться весьма большим.

Как известно, земные биологические объекты состоят в основном из атомов первого и второго рядов Периодической системы, таких, как водород, углерод, кислород, азот. Конечно, в состав живых организмов входят и более тяжелые элементы. Например, в состав человеческого организма обязательно входят 22 элемента, среди которых присутствуют Са (массовая доля 2,4%), К (0,036%), Na (0,1%), Mg (0,06%), Fe (0,007%). Более того, все эти элементы играют биологически важную роль и необходимы организму (интересная статья на эту тему опубликована Ю.Н. Кукушкиным в СОЖ [7]). Тем не менее основа организмов, то есть подавляющее большинство его атомов, — это все-таки водород и атомы второго ряда.

Особенностью атомов второго ряда Периодической системы элементов является то, что для них каскадного взрыва после ионизации $1s$ -оболочки не происходит: возможен только однократный безрадиационный распад вакансии с выбросом одного электрона. Действительно, распад $1s$ -вакансии порождает состояния с вакансиями в $2s$ - и $2p$ -оболочках. При этом $2p$ -вакансия находится в самой внешней оболочке и распадаться не может. Что же касается $2s$ -вакансии, то для нее энергетически разрешен только радиационный $2s-2p$ -переход, не сопровождающийся выбросом электрона, а безрадиационные переходы запрещены по энергии. Покажем это на примере атома кислорода, исследовав возможность $2s-2p$ -перехода. Полные энергии ионов Ag^+ ($1s^2 2s^1 2p^4$) и Ar^{2+} ($1s^2 2s^2 2p^2$), рассчитанные методом Хартри—Фока—Паули, то есть с учетом межэлектрон-

ного взаимодействия и релятивистских эффектов, составляют соответственно $-2003,3$ и $-1988,3$ эВ. Значит, энергия конечного состояния предполагаемого перехода на 15 эВ выше энергии начального состояния и такой переход невозможен.

По причине всего лишь однократного выброса электрона после ионизации $1s$ -оболочки в атомах второго ряда вредное воздействие ионизирующих излучений на биологическое вещество, состоящее в основном из таких атомов, не столь велико. Наличие в биологических объектах в небольших количествах более тяжелых атомов, взрывающихся после ионизации, существенно увеличивает опасные последствия от воздействия ионизирующих излучений. Например, кровь живых организмов наиболее уязвима для воздействия радиации, так как она содержит железо.

По-видимому, может оказаться справедливым следующий достаточно общий вывод: в условиях естественного радиационного фона невозможно представить существование форм жизни на основе элементов более тяжелых, чем элементы второго ряда. Другими словами, биологические объекты, существующие в условиях радиационного фона, не могут состоять в основном из таких элементов, как кремний, фосфор, сера, или более тяжелых. В этом случае практически каждый акт ионизации $1s$ -оболочки вызывал бы каскадный взрыв и стабильное существование достаточно сложных и тонких химико-биологических соединений, обеспечивающих жизнедеятельность, стало бы невозможным.

ЛИТЕРАТУРА

1. Carlson T.A., Krause M.O. // Phys. Rev. 1965. Vol. 137, № 6A. P. A1655–A1662.
2. Krause M.O., Carlson T.A. // Ibid. 1967. Vol. 158, № 1. P. 18–24.
3. Saito N., Suzuki I.H. // J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. 1992. Vol. 25. P. 1785–1793.
4. Ермаков С.М. Метод Монте-Карло и смежные вопросы. М.: Наука, 1975.
5. Kochur A.G., Dudenko A.I., Sukhorukov V.L., Petrov I.D. // J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. 1994. Vol. 27. P. 1709–1721.
6. Kochur A.G., Sukhorukov V.L., Dudenko A.I., Demekhin Ph.V. // Ibid. 1995. Vol. 28. P. 387–402.
7. Кукушкин Ю.Н. Химические элементы в организме человека // Соросовский Образовательный Журнал. 1998. № 5. С. 54–58.

Рецензент статьи Н.Б. Делоне

* * *

Андрей Григорьевич Кочур, доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики Ростовского государственного университета путей сообщения. Область научных интересов – рентгеновская и электронная спектроскопия атомов и молекул. Автор более 100 научных работ.